

Prof. dr hab. Adam Kiejna
Wydział Fizyki i Astronomii
Uniwersytetu Wrocławskiego

**Recenzja osiągnięć naukowych dr Magdaleny Popielskiej
ubiegającej się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych
i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne na podstawie cyklu publikacji
pt. „Badanie właściwości fizycznych warstwowych materiałów
typu van der Waalsa metodami ab initio”**

Niniejsza recenzja osiągnięć naukowych habilitantki została wykonana w oparciu o obowiązujące kryteria oceny określone w art. 219 ust. 1 pkt 2, ustawy z dnia 20 lipca 2018 r.

Przebieg pracy naukowej i zawodowej habilitantki

Pani Magdalena Popielska (w publikacjach występuje pod nazwiskiem paniieńskim Birowska) ukończyła z wyróżnieniem studia magisterskie na kierunku fizyka na Wydziale Fizyki, Uniwersytetu Jagiellońskiego w 2008 roku. W tym samym roku tamże uzyskała magisterium z biofizyki. Z podanej w Załączniku 3 informacji o przyznanych stypendiach naukowych i nagrodach dla najlepszych doktorantów Uniwersytetu Warszawskiego (UW) wynika, że w latach 2009-2014 pani Magdalena Birowska była słuchaczką studium doktoranckiego na Wydziale Fizyki UW. W listopadzie 2014 r., obroniła pracę doktorską pt. „Jednoosiowa magnetyczna anizotropia w rozcieńczonym półprzewodniku półmagnetycznym (Ga,Mn)As”, wykonaną w Instytucie Fizyki Teoretycznej UW pod kierunkiem prof. dr. hab. Jacka A. Majewskiego i uchwałą Rady Wydziału Fizyki UW uzyskała stopień naukowy doktora nauk fizycznych w zakresie fizyki. Od grudnia 2014 r. do chwili obecnej dr Magdalena Popielska jest zatrudniona na Wydziale Fizyki UW, wcześniej na stanowisku adiunkta naukowego, finansowanym z projektów Narodowego Centrum Nauki (NCN), a od października 2020 roku na stanowisku adiunkta badawczo-dydaktycznego. W tym okresie dwukrotnie korzystała z półrocznego urlopu macierzyńskiego.

Kandydatka nie ubiegała się uprzednio o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

Informacje o osiągnięciach naukowych habilitantki

Przedstawione osiągnięcie naukowe składa się z ośmiu powiązanych ze sobą tematycznie prac opublikowanych w ostatnich pięciu latach, w dobrych czasopismach o zasięgu międzyrodowym, oznaczonych chronologicznie numerami [H1] do [H8]: Nanotechnology [H1], AIP Advances [H2], Computational Materials Science [H3], Physical Review B [H4], Nanomaterials [H5], Journal of Physical Chemistry C [H6], Physical Review Research [H7] i Journal of Materials Chemistry C [H8]. Tematem wiodącym tych prac jest opis teoretyczny metodami *ab initio* właściwości fizycznych materiałów warstwowych typu van der Waalsa (vdW). Badania teoretyczne prowadzone przez habilitantkę mają ścisły związek z eksperymentem i część tych prac powstała w wyniku bezpośredniej współpracy z grupami doświadczalnymi. Wszystkie powstały we współpracy z wieloma autorami – siedem z nich z

trzema lub więcej. Z oświadczeń przedstawionych przez autorów, dotyczących ich wkładu w powstałe publikacje wynika, że jeżeli chodzi o część teoretyczną tych prac, habilitantka była osobą wnoszącą wiodący wkład w planowanie i wybór metodologii prowadzonych obliczeń, ich nadzór, oraz walidację i interpretację wyników.

Według bazy Web of Science, na pełny dorobek publikacyjny habilitantki składa się ponad 30 prac opublikowanych w czasopismach znajdujących się na liście Journal Citation Reports. 25 prac zostało opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora. Habilitantka ma swym dorobku publikacje w wysoko punktowanych czasopismach (np. Physical Review Letters (1 praca), Physical Review B (4), Advanced Functional Materials (1 praca), Advanced Materials (2 prace przeglądowe), Journal of Materials Chemistry C (1 praca), Journal of Physical Chemistry C (1 praca), 2D Materials(1 praca)). W jej dorobku nie znalazłem prac samodzielnych. W ośmiu pracach występuje jako pierwsza a w czterech jako ostatnia na liście autorów. Na dzień wystąpienia z wnioskiem o wszczęcie postępowania habilitacyjnego, trzy prace umieszczone w bazie arXiv, ale liczone już jako publikacje, były jeszcze na etapie recenzowania. Sumaryczny współczynnik wpływu (ang. impact factor) wszystkich prac wynosi **192,9**, a ich sumaryczna punktacja ministerialna **3190**. Według bazy Web of Science (WoS), ogólna liczba cytowań (bez autocytowań) oraz indeks Hirscha, którymi legitymuje się habilitantka na dzień wszczęcia postępowania habilitacyjnego wynoszą odpowiednio **390** i **12**, co świadczy o tym, że jej prace spotkały się z dobrym oddźwiękiem w środowisku. Prace opublikowane po uzyskaniu stopnia doktora były cytowane **265** razy. Artykuły składające się na rozprawę habilitacyjną były cytowane **79** razy. Ich sumaryczny impact factor wynosi ponad **35**, a punktacja ministerialna **810**. Powyższe dane bibliometryczne wskazują, że recenzowany cykl prac stanowi solidną podstawę postępowania habilitacyjnego.

Ocena osiągnięcia naukowego habilitantki

W ostatnich pięciu latach działalność naukowa habilitantki była związana z tematyką materiałów warstwowych typu vdW i skupiała się na badaniach teoretycznych ich właściwości strukturalnych, elektronowych, optycznych i magnetycznych. W rozprawie habilitacyjnej rozważane są następujące aspekty właściwości fizycznych tych materiałów: (i) efekty fizyczne indukowane naprężeniami; (ii) efekty fizyczne indukowane podłożem; (iii) zależność od zmiany wymiarowości układu; (iv) wpływ domieszkania; (v) zmiany właściwości indukowane porządkiem magnetycznym. Powyższe aspekty były rozpatrywane i badane w odniesieniu do różnych materiałów warstwowych, a mianowicie, grafenu, czarnego fosforu, heksagonalnego azotku boru, dichalkogenków metali przejściowych, trichalkogenków fosforu metali przejściowych oraz CrSBr. Obliczenia kwantowo-mechaniczne stanu podstawowego i elektronowej struktury pasmowej były przeprowadzone przy wykorzystaniu teorii funkcjonału gęstości (ang. DFT) oraz metody pseudopotencjału do opisu oddziaływań elektronów z rdzeniami jonowymi, wdrożonych w pakietach programowych VASP i Quantum Espresso, wykorzystujących periodyczne warunki brzegowe i superkomórki. Obliczenia DFT prowadzono w ramach uogólnionego przybliżenia gradientowego (ang. GGA) dla funkcjonału wymiennie-korelacyjnego (ang. XC) z półempiryczną poprawką Grimme'a (lub jej wariantami) do opisu słabych sił vdW. W obliczeniach właściwości magnetycznych stosowano formalizm GGA+U oparty na modelu Hubbarda, a do obliczenia energii wiązań ekscytonów wykorzystano model efektywny oparty na równaniu Bethe-Salpeter.

Prace [H2] i [H5] dotyczą badania efektów fizycznych indukowanych naprężeniami w kryształach. W heterostrukturach vdW, tworzonych warstwa po warstwie z izolowanych płaszczyzn,

wiązania kowalencyjne zapewniają stabilność w płaszczyźnie dwuwymiarowego (2D) kryształu, podczas gdy stosunkowo słabe siły vdW są wystarczające aby utrzymać sąsiednie warstwy razem. Silne naprężenia powstające w strukturze na skutek niedopasowania sieci mogą prowadzić do powstania defektów i dyslokacji. Zrozumienie i kontrola mechanizmu relaksacji naprężeń przy wysokim niedopasowaniu sieci, umożliwi inżynierię struktury pasmowej materiałów. W [H2] opisano narzędzie, które ułatwia wyznaczenie superkomórki dla sieci niewspółmiernych w materiałach warstwowych, w szczególności takich jak heterostruktury vdW. Opracowane oprogramowanie ułatwia znalezienie i skonstruowanie zoptymalizowanych superkomórek (tj. o niewielkich rozmiarach i minimalnej akumulacji odkształceń w sąsiednich warstwach) dla struktur składających się z dwóch lub więcej nałożonych na siebie 2D sieci. Program przeszukuje wszystkie możliwe superkomórki składające się z wielokrotności komórek pierwotnych dla danego kąta obrotu między górną i dolną strukturą 2D i pozwala na określenie optymalnych tzw. kątów magicznych pomiędzy sąsiednimi ułożonymi pionowo materiałami 2D, a także wynikającymi z nich wzorami moiré. Praca [H5] jest poświęcona badaniom zmian w strukturze pasmowej zachodzących pod wpływem naprężeń zewnętrznych w strukturach warstwowych dichalkogenków metali przejściowych. Unikatowa giętkość i wytrzymałość tych związków sprawia, że są one idealnymi materiałami do wykorzystania w inżynierii przerwy energetycznej. Zbadano ewolucję struktury pasmowej politypu 1T wybranych związków MX_2 ($M=Hf, Zr, Sn$; $X=S, Se$) pod wpływem zewnętrznych naprężeń ściskających. W celu poprawy opisu przerwy energetycznej do obliczeń struktury pasmowej wykorzystano zmodyfikowany potencjał Becke'go-Johnsona oraz uwzględniono oddziaływanie spinowo-orbitalne. Dla każdego związku, wyznaczono ilościowe trendy zmian w energii przejść optycznych pod wpływem różnych naprężeń zewnętrznych, wyznaczając tzw. liniowe współczynniki ciśnienia. Ich ujemne wartości wskazują na zwęźnianie przerwy energetycznej i pozwalają przewidzieć przejścia typu półprzewodnik-metal przy izotropowym naprężeniu ściskającym (hydrostatycznym). Obliczone współczynniki ciśnienia są w doskonałej zgodności z wartościami zmierzonymi doświadczalnie.

Prace [H1], [H3] i [H4] dotyczą badania efektów fizycznych indukowanych podłożem. W [H1] badano wpływ podłoża z heksagonalnego azotku boru (hBN) na właściwości strukturalne i drgania sieci krystalicznej warstw czarnego fosforu (ang. black phosphorus – BP), który podlega szybkiej degradacji w powietrzu. Aby temu zapobiec stosuje się hermetyzację (ang. encapsulation), polegającą na otoczeniu BP innym materiałem 2D, np. hBN. Zbadano wpływ hermetyzacji hBN na strukturalne i wibracyjne właściwości kilkuwarstwowego BP. Ujawniono, że warstwy powierzchniowe BP inaczej oddziałują z warstwami sąsiednimi niż warstwy głębiej położone, co odzwierciedla się w ich różnej sztywności. Konsekwencją tego jest rozszczepienie fononu optycznego o wysokiej częstotliwości obserwowanego w widmie ramanowskim, który jest przesunięty ku niższym częstotliwościom. Hermetyzacja hBN wywołuje naprężenia w warstwach BP, dodatkowo wzmacniając przesunięcie ku czerwieni tego optycznie aktywnego modu drgań. Te przewidywania są zgodne z wynikami spektroskopii ramanowskiej i pokazują, że hermetyzacja stwarza możliwość, kontrolowanej przez podłoże, inżynierii naprężeń w atomowo cienkich warstwach krystalicznych. W [H3] zbadano właściwości energetyczne i strukturalne częściowo uwodornionego grafenu zarówno w próżni jak i zaadsorbowanego na powierzchni niklu. Wyniki pokazują, że energia adsorpcji wodoru na grafenie zaadsorbowanym na podłożu z niklu jest wzmocniona w porównaniu z grafenem w próżni, co jest związane z tworzeniem się tzw. wiązań pseudo-kowalencyjnych pomiędzy warstwą grafenu i podłożem niklowym. Wskazuje to dobitnie, że podłoże

niklowe działa stabilizująco i ułatwia tworzenie się uwodornionego grafenu. W [H4] zbadano jaką rolę w zastosowaniach optoelektronicznych pojedynczych warstw trichalkogenków fosforu metali przejściowych odgrywa podłoże. Wychodząc od stałej dielektrycznej uzyskanej z obliczeń DFT+U, oraz stosując efektywny model oparty na formalizmie równania Bethe-Salpeter obliczono energię wiązania ekscytonów w MnPS₃. Pokazano, że energia wiązania ekscytonów w monowarstwie MnPS₃ (związana z ekranowaniem dielektrycznym otoczenia) jest silnie modyfikowana podłożem i na podłożu SiO₂ i hBN może zostać zredukowana, odpowiednio o około dwa i trzy razy w porównaniu do próżni.

W pracach [H1] i [H4] zbadano również wpływ zmiany wymiarowości układu na jego właściwości fizyczne. W [H4] wykazano, że w warstwowym MnPS₃, przy przejściu od materiału objętościowego do monowarstwy przerwa pasmowa zmienia swój charakter ze skośnej na prostą, czemu towarzyszy wzrost jej szerokości o 200 meV oraz niewielka zmiana stałej sieci. W przypadku monowarstwy, ekstrema pasm w pierwszej strefie Brillouina występują w punkcie o wysokiej symetrii a dla objętościowego MnPS₃ w punktach o niskiej symetrii. Krzywizny najwyższego zapełnionego pasma walencyjnego oraz najniższego niezapełnionego pasma przewodnictwa nie zależą od liczby warstw tym materiale. Pokazano również, że energie wiązania ekscytonów zależą silnie od liczby warstw, co związane jest głównie ze zmianą ekranowania pola elektrycznego materiału. Ograniczenie kwantowe w monowarstwie MnPS₃ w próżni powoduje czterokrotny wzrost energii wiązania ekscytonów, w porównaniu do tej w odpowiedniku objętościowym. Wyniki [H1] pokazują, że dla czarnego fosforu częstość drgań optycznie aktywnego modu fononowego zależy silnie od liczby warstw. Dla monowarstwy, obserwuje się przesunięcie tego modu ku wyższym częstościom w porównaniu do 5-warstwowego BP. Ponadto, warstwy BP wykazują anomalną ewolucję częstości fononów wraz ze wzrostem liczby warstw.

Prace [H3], [H6], i [H7] dotyczą wpływu domieszkowania na właściwości materiałów warstwowych. W [H3] zbadano energetykę i zmiany strukturalne wywołane adsorpcją atomów wodoru na powierzchni grafenu. Profil zależności energii adsorpcji od odległości wykazuje dwa minima, odpowiadające adsorpcji chemicznej i fizycznej, położone odpowiednio bliżej i dalej od grafenu. Pierwsze z nich odpowiada silnej adsorpcji chemicznej (chemisorpcji) a drugie słabej adsorpcji typu van der Waalsa (fizysorpcji). Chemisorpcja wodoru, w zależności od stopnia pokrycia, wywołuje duże zmiany strukturalne w warstwie grafenowej, która ulega pofałdowaniu. Te zmiany strukturalne mogą wpływać na właściwości elektronowe grafenu, co oznacza, że przerwa pasmowa może być kontrolowana przez stopień pokrycia wodorem. W [H7] zbadano wpływ domieszkowania podstawieniowego atomów niemagnetycznych na właściwości układów warstwowych MnPS_{3-x}Se_x i NiPS_{3-x}Se_x. Badania ujawniły różny charakter trendu ewolucji temperatury Néela wraz ze zmianą stopnia domieszkowania w materiałach zawierających Mn i Ni. Wykazano związek tego efektu z większymi wartościami całek wymiany dla struktur zawierających Ni, w porównaniu do struktur z Mn, i przedyskutowano dominujące mechanizmy wymienne w tych związkach. Pokazano, że podstawienie chalkogenkowe jest dobrą metodą kontrolowania anizotropii magnetycznej w materiałach warstwowych. W pracy [H6] badano właściwości magnetyczne monowarstw MPX₃ rozważając różne typy domieszek magnetycznych podstawionych w podsić złożoną z atomów metalu gospodarza, w stopach (M_{3/4}X_{1/4})PS₃, gdzie M=Mn, Ni i X=Mn, Ni, Cr. Celem było wyjaśnienie możliwości wzmocnienia oddziaływania ferromagnetycznego (FM) w tych związkach przez domieszkowanie. Wykazano, że domieszki magnetyczne nie wpływają na zmianę uporządkowania magnetycznego obserwowanego dla czystych związków. Jednakże, w przeciwieństwie do czystych związków, mieszane całki wymiany dla pierwszych i trzecich sąsiadów są

tego samego rzędu wielkości, co może prowadzić do frustracji różnych porządków antyferromagnetycznych, a w konsekwencji może być jedną z przyczyn obserwowanej niższej temperatury Néela dla stopów.

W pracach [H4] i [H8] badano zmiany właściwości fizycznych indukowane porządkiem magnetycznym w magnetycznych materiałach warstwowych z rodziny trichalkogenków metali przejściowych MPX_3 . W [H4] pokazano, że uporządkowanie magnetyczne silnie wpływa na właściwości elektronowe, transportowe i optyczne monowarstwów $MnPS_3$. W szczególności, ujawniono silny wpływ uporządkowania spinów na właściwości struktury pasmowej, takie jak położenie pasm, przecięcia pasm, krzywizna pasm czy wartości przerw pasmowych. W przypadku właściwości optycznych pokazano, że energie wiązania ekscytonów z krawędzi pasm zależą od uporządkowania magnetycznego. Wykazano, że antyferromagnetyczna (AFM) konfiguracja spinów jest wrażliwa na polaryzację światła co sprawia, że uporządkowanie AFM w monowarstwie $MnPS_3$ można wywnioskować pośrednio z różnej polaryzacji światła. W [H8] zbadano wpływ pozapłaszczyznowego uporządkowania magnetycznego na właściwości strukturalne, elektronowe i drgania sieci objętościowego kryształu $CrSBr$. Wykazano, że uporządkowanie magnetyczne wpływa na strukturę elektronową na kierunku wysokiej symetrii w strefie Brillouina, powodując rozszczępienie pasm przewodnictwa dla FM uporządkowania spinów w sąsiednich warstwach, podczas gdy dla fazy AFM pasma pozostają spinowo zdegenerowane. Dodatkowo, charakter przerwy pasmowej ulega zmianie z prostej na pośrednią. Zidentyfikowano także, optycznie aktywne mody ramanowskie, wrażliwe na międzywarstwowe uporządkowanie magnetyczne, które można zatem traktować jako markery magnetyczne rodzaju pozapłaszczyznowego porządku magnetycznego.

Dodatkowe informacje o aktywności naukowej habilitantki oraz informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych i popularyzujących naukę

Po ukończeniu studiów doktoranckich, dr Popielska odbyła dwuletni staż podoktorski w grupie teoretycznej prof. J. A. Majewskiego. W latach 2018-23 zbudowała kilkuosobowy zespół badawczy, specjalizujący się w obliczeniach materiałów niskowymiarowych metodami ab initio i nawiązała szeroką współpracę, zarówno z zespołami doświadczalnymi jak i teoretycznymi z jednostek krajowych i zagranicznych (m.in. z Izraela, Niemiec, USA). Habilitantka nie przebywała na dłuższych pobytach naukowych za granicą. Zdobyła dodatkowe doświadczenie naukowe podczas licznych pobytów na międzynarodowych szkołach i warsztatach zagranicą. Brała udział w wielu międzynarodowych konferencjach naukowych, na których wielokrotnie prezentowała wyniki swoich badań w formie wystąpień ustnych (w tym trzy zaproszone) oraz plakatów. Wygłosiła także cztery wykłady seminaryjne w ośrodkach naukowych, dwa zagranicą w Niemczech, jeden w Austrii oraz jeden na Politechnice Wrocławskiej.

Działalność naukowa habilitantki jest dobrze rozpoznawana w świecie o czym świadczy m.in. fakt częstego powierzania jej recenzowania artykułów przez wiele czasopism naukowych, w tym renomowanych Nature Communications, Physical Review B, czy 2D Materials. Uczestniczyła także jako recenzent w zespole oceniającym wnioski o przyznanie Fulbright Junior Research Award w roku 2022/23 na rzecz Polsko-Amerykańskiej Komisji Fulbrighta.

Habilitantka pełniła rolę kierownika w zrealizowanym projekcie SONATA oraz wykonawcy w projekcie HARMONIA NCN. Obecnie kieruje z ramienia UW projektem OPUS realizowanym w konsorcjum z Politechniką Warszawską oraz jest kierownikiem zakończonego projektu IDUB.

Habilitantka zdobyła znaczny dorobek dydaktyczny. Prowadziła dwa wykłady (w tym jeden kursowy) oraz ćwiczenia z różnych przedmiotów na Wydziale Fizyki UW. Była promotorem kilku prac magisterskich i licencjackich. Jest promotorem pomocniczym trzech doktorantów.

W zakresie popularyzacji wiedzy wygłosiła wykład w firmie farmaceutycznej Astra Zeneca na temat badania właściwości materiałów 2D oraz wykladała i prowadziła ćwiczenia na temat zaawansowanego przetwarzania danych podczas letniej szkoły zorganizowanej przez ICM UW.

Podsumowanie

Na podstawie przedstawionej wyżej analizy stwierdzam, że przedstawiony przez habilitantkę cykl publikacji stanowi istotne osiągnięcie naukowe i stanowi krok w kierunku głębszego zrozumienia właściwości strukturalnych, elektronowych, optycznych i magnetycznych materiałów warstwowych typu van der Waalsa, a uzyskane w nim wyniki mogą mieć znaczenie aplikacyjne. Osiągnięcia te wnoszą znaczący wkład w rozwój dyscypliny nauki fizyczne i odpowiadają wymaganiom określonym w Ustawie. Wnoszę o dopuszczenie pani dr Magdaleny Popielskiej do dalszych etapów postępowania o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

Wrocław, 20 maja 2024 r.

